

Title	電子不足部位を有する環状 共役分子の合成
Author(s)	橋本, 士雄磨
Citation	京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 (2019), 2018: 9-9
Issue Date	2019-03
URL	http://hdl.handle.net/2433/241138
Right	
Type	Article
Textversion	publisher

電子不足部位を有する環状 π 共役分子の合成

Synthesis of cyclic π -conjugated molecules with electron deficient moieties

京都大学化学研究所 材料機能化学研究系 高分子制御合成研究領域 橋本 士雄磨

研究成果概要

環状 π 共役分子であるシクロパラフェニレン (CPP) 及びその誘導体は、化学と材料科学の両面から注目を集める分子群である。中でも、 π 共役骨格に電子求引性基を導入したものは、 n 型半導体材料などへの応用も期待できる。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新たに電子不足なテトラフルオロアリーレン部位を有する CPP 誘導体の理論計算に取り組んだ。

目的の CPP 誘導体である 8F-[6]CPP と 12F-[9]CPP について TD-DFT 計算 [B3LYP/6-311+G(d,p)]を行なったところ、HOMO から LUMO への遷移はいずれも禁制と予測され、実際の吸収スペクトル波形の傾向と一致していることがわかった。また、フッ素原子導入により HOMO、LUMO 準位を制御できる知見は、今後の材料研究への応用にも期待できる。

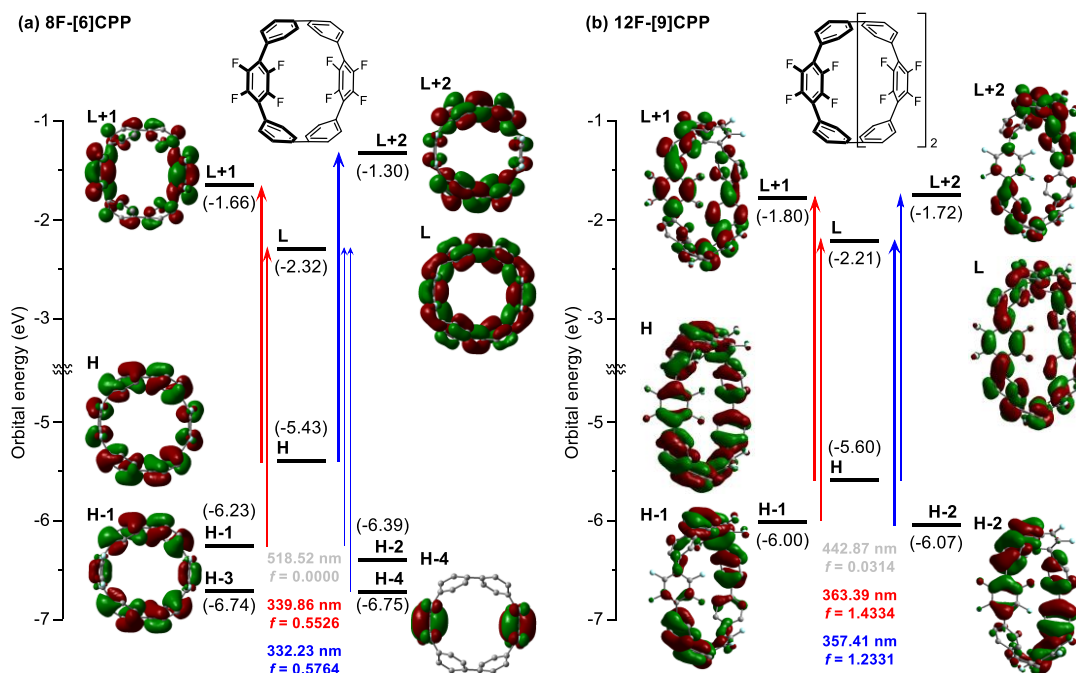


Figure 1. Summary of TD-DFT calculation [B3LYP/6-311+G(d,p) level of theory].

発表論文(謝辞あり)

“Synthesis and Physical Properties of Polyfluorinated Cycloparaphenylenes”

Hashimoto, S.; Kayahara, E.; Mizuhata, Y.; Tokitoh, N.; Takeuchi, K.; Ozawa, F.; Yamago, S.
Org. Lett. **2018**, *20*, 5973-5976.